

創薬・医療

1. 課題の概略（社会的な課題 vs 計算科学）

- 個人ゲノム: 次世代シーケンサの高速データ解析と遺伝子ネットワーク解析
- 複合因子が関わる疾患: 遺伝子ネットワーク解析と細胞シミュレーションに至るマルチ解析
- 新薬開発の難易度化: 計算創薬による効率化
- 疾患機構の未解明: マルチスケールシミュレーションによる分子から全身に至る疾患機構の解明
- 患者のquality of lifeの向上: 全身シミュレーションによる低侵襲治療支援
- ナノバイオものづくり: 生体分子を応用した新しい機能性ナノ分子材料開発支援
- 社会実装: 最先端スパコンから現業レベルへの下方展開

2. サイエンスの質的变化（従来 vs 将来の科学）

- 従来: ナノ、バイオ分野それぞれが別々にあった。分野の中もそれぞれ別々。経験に基づく創薬／医療支援。また、単純なモデルにとどまっていた（例えば、単純な脳回路）。
- 将来: ナノバイオ分野の融合（マルチフィジックス）、分子のレベルの第一原理的計算を生命分野に展開。ビッグデータ（データ同化）の活用。理論・メカニズムにもとづく、合理的創薬、医療支援。生命の原理を見いだすための大規模で詳細なモデル化。大規模で詳細な脳のモデル化人間・動物の持つ高度情報処理機能に迫る

3. コミュニティからの意見

- バイオインフォマティクスからの意見: 従来のHPCとは異なる点がある
- 創薬分野からの意見: 大規模実験施設との連携
- 医療分野からの意見: 医学系との連携

4. 計算機要求

- それぞれの要求を表にまとめて、ここには代表例を書き込む